

Analyses non destructives et instantanées de médicaments à l'aide d'une technologie NIR portable basée sur le cloud et l'apprentissage automatique

Journées scientifiques ccCTA 2024

4 octobre 2024

Hervé Rais, Prof. Pierre Esseiva, Prof. Olivier Delémont

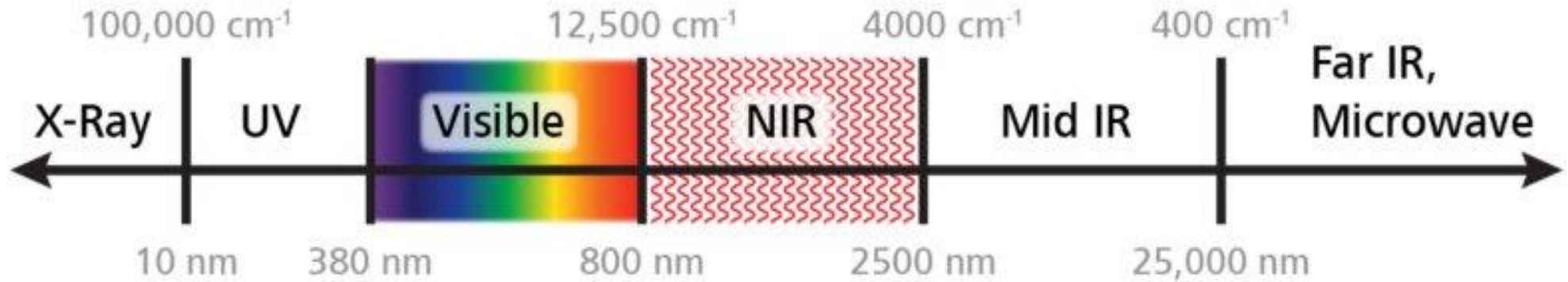


UNIL | Université de Lausanne

Ecole des sciences criminelles



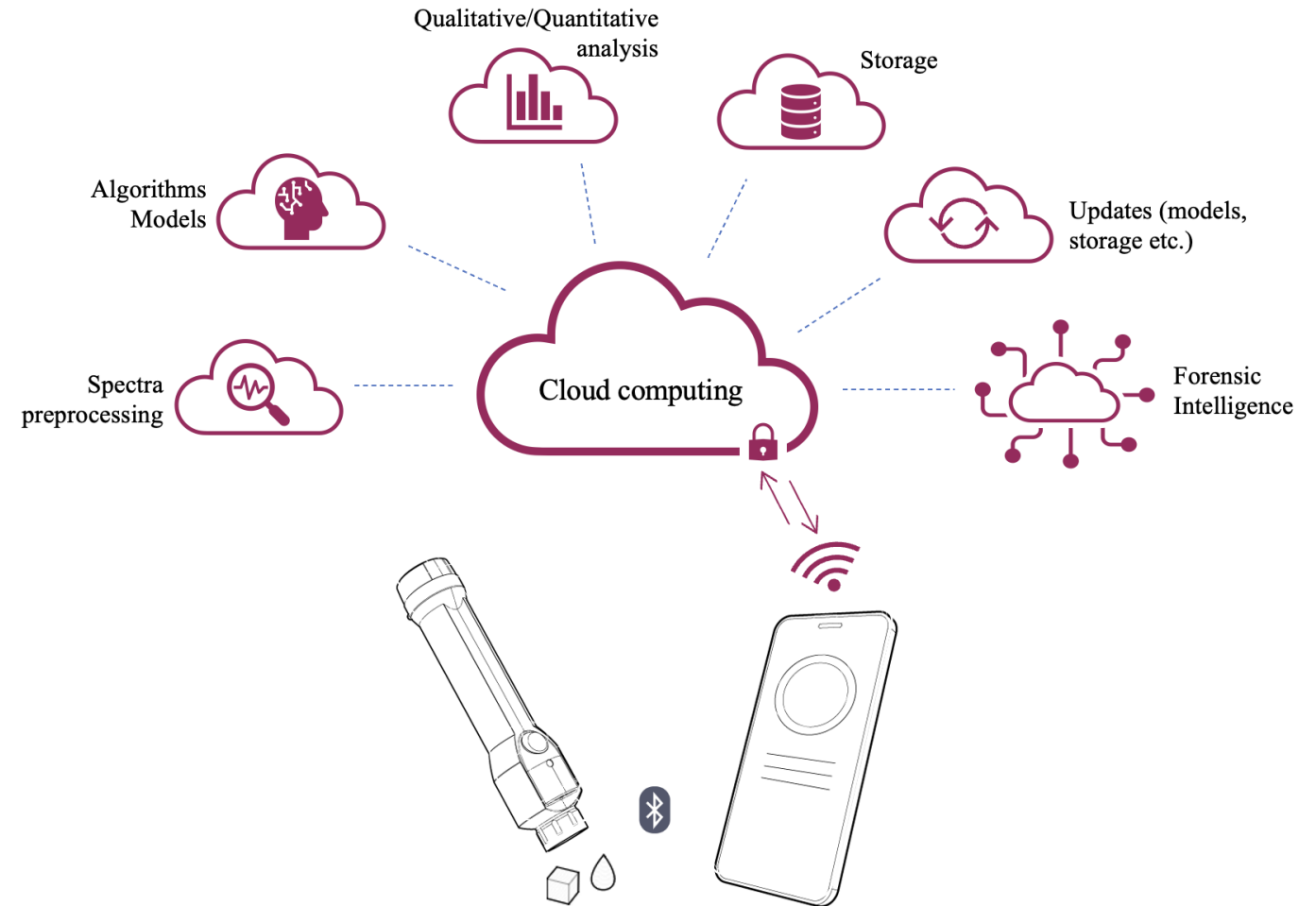
Spectroscopie NIR “Near-Infrared”



Spectre NIR = vibrations harmoniques + combinaisons de vibrations fondamentales pour X-H

- ✗ Spectre brut = peu informatif
- ✗ Influence de la matrice
- ✗ Echantillon inconnu de la BDD
- ✓ Pas / peu de préparation d'échantillons
- ✓ Facile d'utilisation / Rapide / Non destructif
- ✓ Pas d'impact de la fluorescence
- ✓ Relativement peu coûteux

MicroNIR OnSite-W de Viavi Solutions



Unil

UNIL | Université de Lausanne

Ecole des sciences criminelles

Exemple pratique - Viagra

Discriminer entre des comprimés authentiques et falsifiés ?



6'659 saisies
(2023 - Swissmedic)

Unil

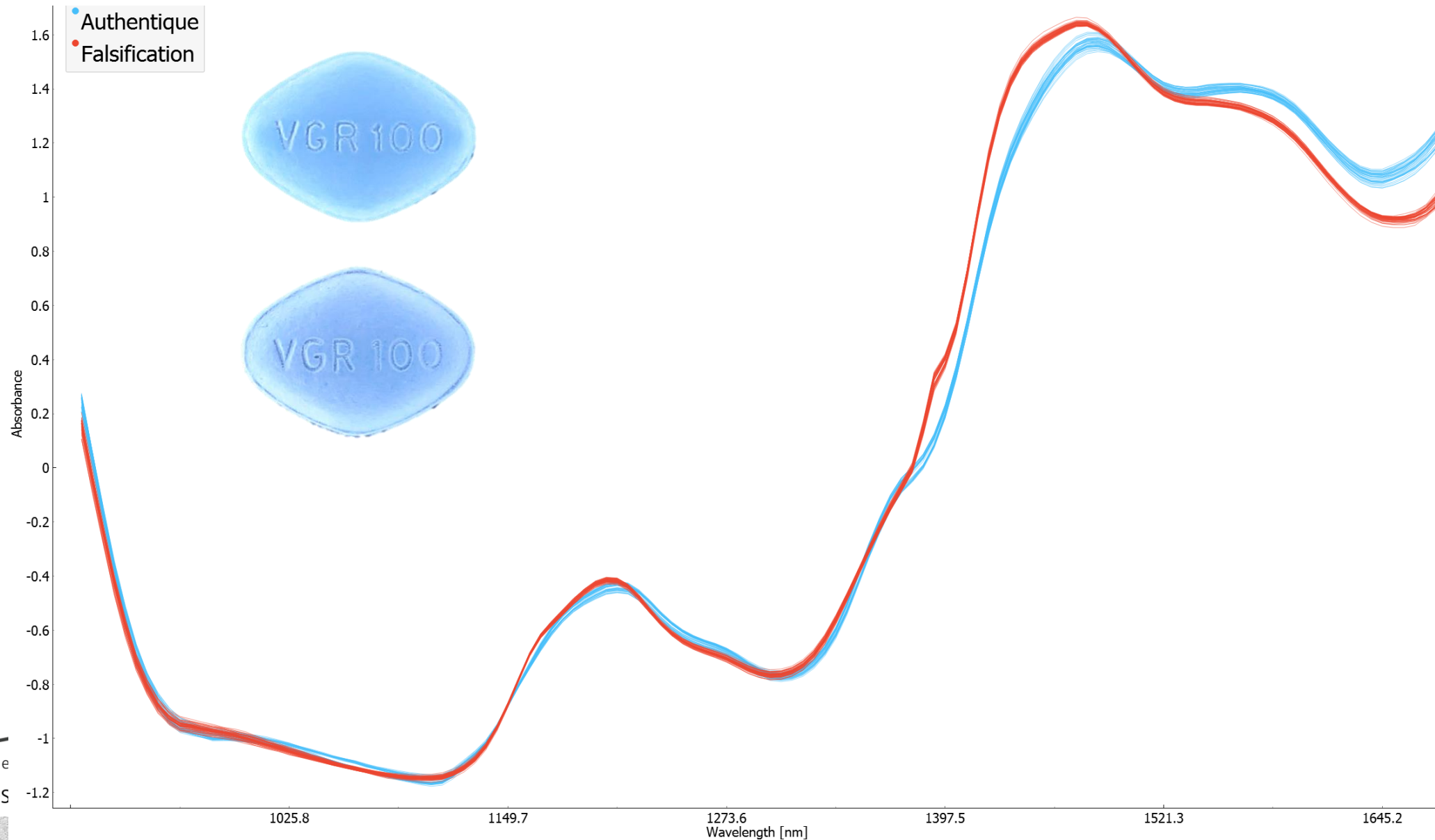
UNIL | Université de Lausanne

Ecole des sciences criminelles

<https://www.ashcroftpharmacy.co.uk/online-doctor/ed/Sildenafil-generic/>

<https://www.swissmedic.ch/swissmedic/fr/medicrime/news/statistics/illegal-importierte-arzneimittel-2023.html#:~:text=En%202023%2C%20l'Office%20f%C3%A9d%C3%A9ral,institut%20suisse%20des%20produits%20th%C3%A9rapeutiques.>

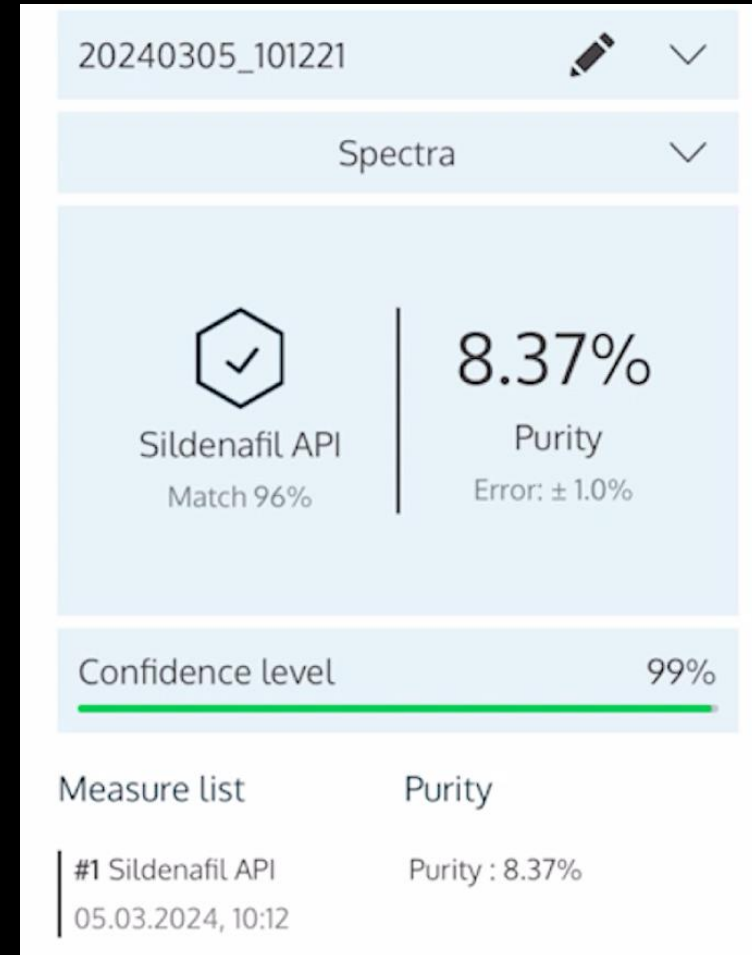
Authentique vs Falsification



Viagra – 10 comprimés authentiques et 122 comprimés falsifiés



Viagra – Implémentation concrète

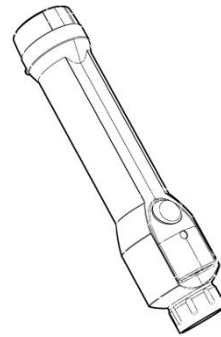
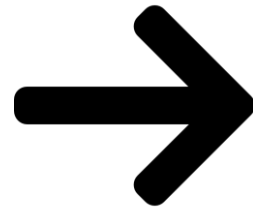


Exemple pratique - Viagra

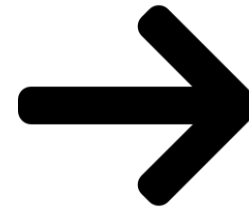
Identification et quantification du ou des principes actifs ?



**48 comprimés falsifiés
22 saisies différentes**



Spectres NIR



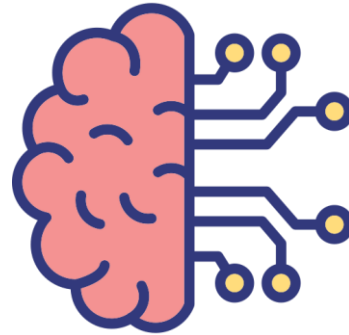
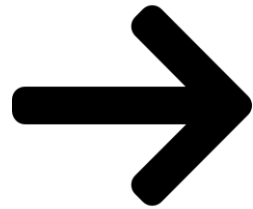
**UHPLC-UV
Valeurs de référence
(collaboration ISPSO)**

Exemple pratique - Viagra

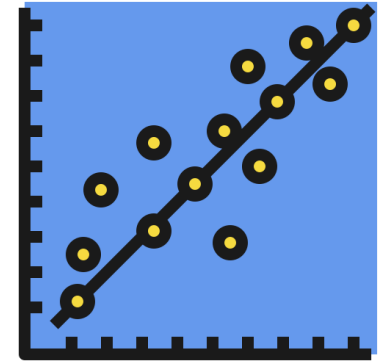
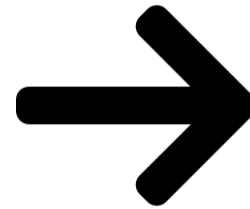
Identification et quantification du ou des principes actifs ?



35 comprimés
Spectres NIR + Valeurs de référence



Machine Learning

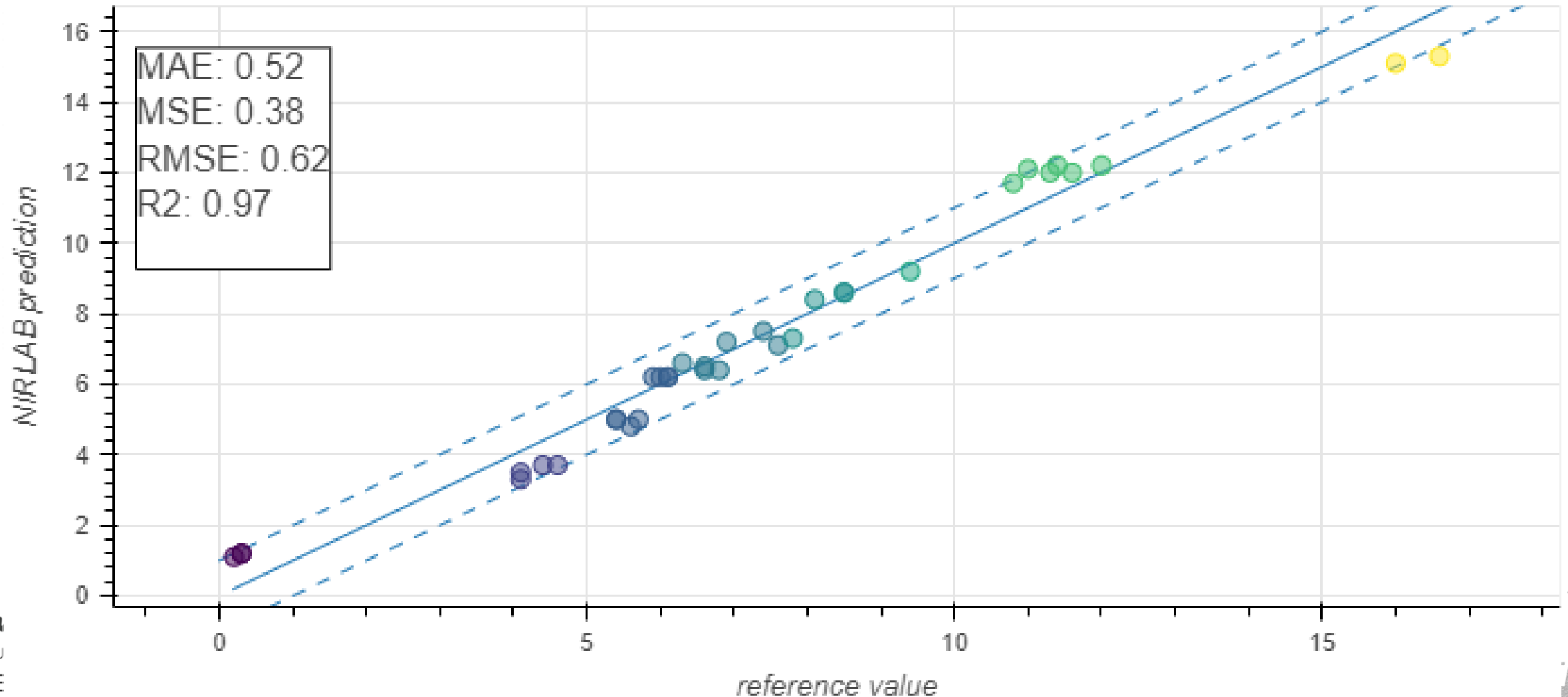


**Modèle de quantification du
Sildénafil**



Modèle créé à partir de 35 comprimés

Concentration de sildénafil = masse sildénafil / masse comprimé

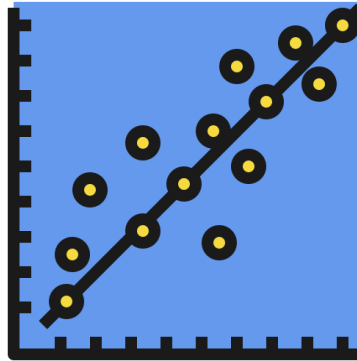
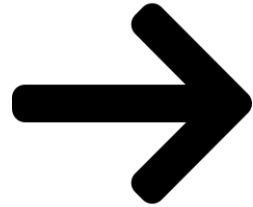


Exemple pratique - Viagra

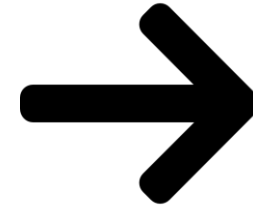
Identification et quantification du ou des principes actifs ?



13 comprimés
Spectres NIR



**Modèle de quantification du
Sildénafil**



« 8,37% Sildénafil »



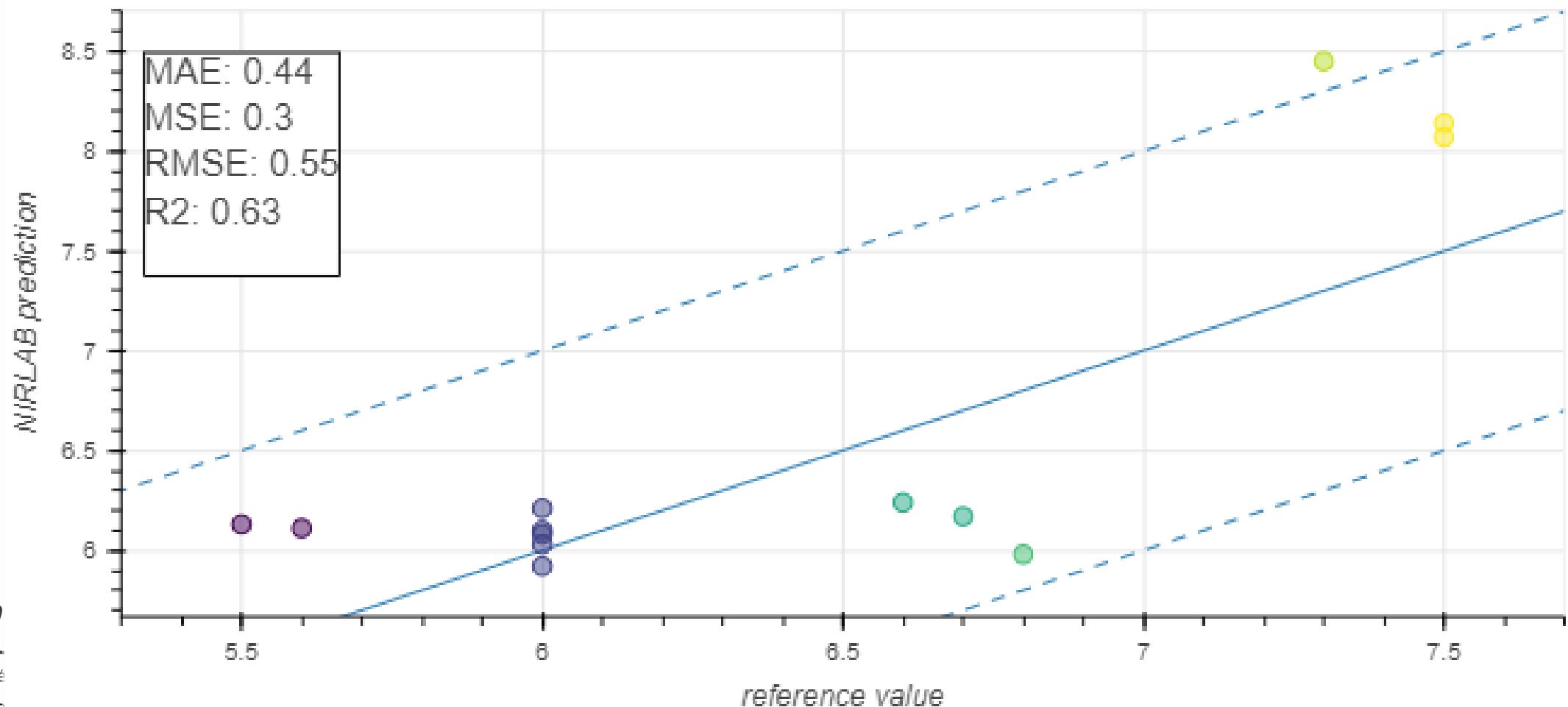
Prédictions



Prédiction sur les 13 comprimés restants

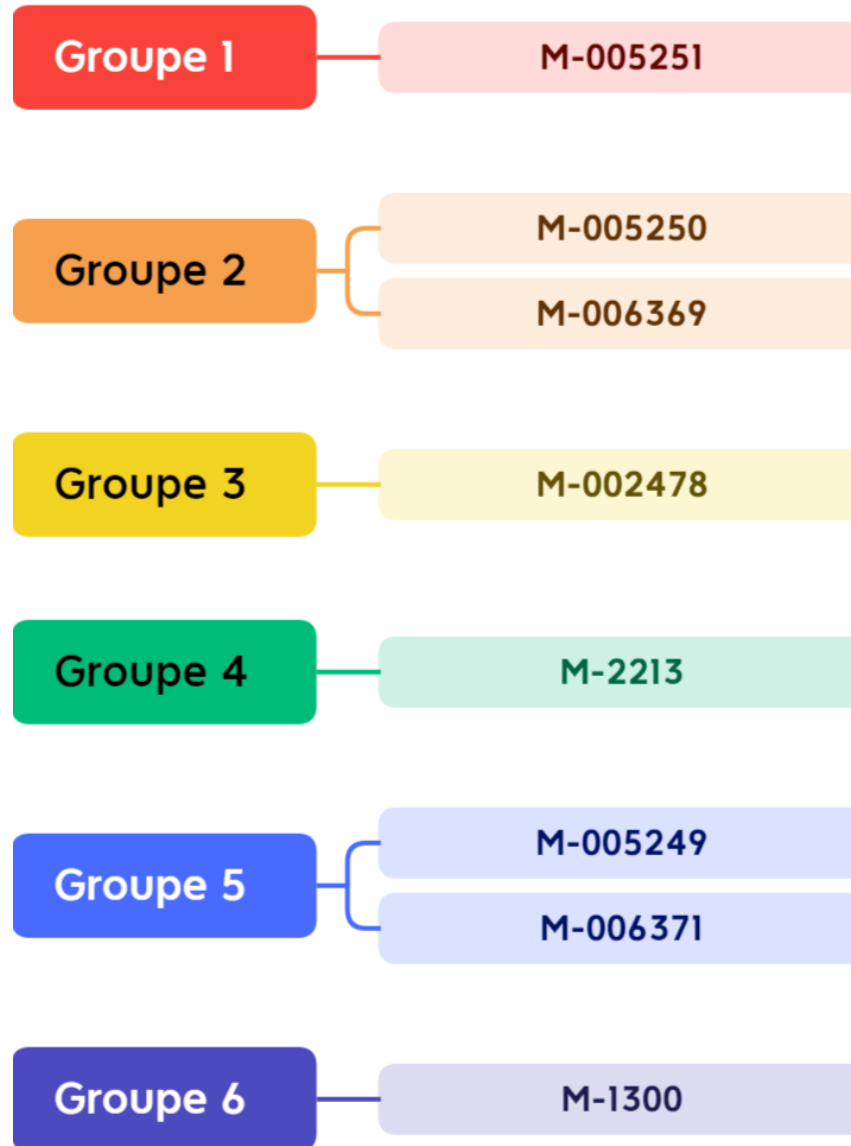
Erreur de prédiction moyenne de **3 mg**, maximum de **9 mg**

Quantité moyenne de **47 mg** => erreur relative moyenne de **7%**, maximum à **16%**



Exemple pratique - Viagra

Liens entre les différentes saisies ?



Exemples d'applications

Points de vente dans les pays en développement



Douanes suisses



Unil

UNIL | Université de Lausanne

Ecole des sciences criminelles

Exemples d'applications

Buyers' Club - HUG



Homologué / ~ **10'000 CHF** pour 28 comprimés



Non homologué / ~ **160 CHF** pour 28 comprimés

Unil

UNIL | Université de Lausanne

Ecole des sciences criminelles

Merci !



Unil

UNIL | Université de Lausanne

Ecole des sciences criminelles

